18<sup>ème</sup> Congrès Français de Mécanique

Grenoble, 27-31 août 2007

# Estimation de la perméabilité d'une argilite partiellement saturée par méthode inverse

#### Richard Giot, Dragan Grgic, Albert Giraud & Françoise Homand

LaEGO-ENSG, Nancy Université LAboratoire Environnement Géomécanique et Ouvrages BP 40, Vandœuvre-Lès-Nancy, F-54501 France Richard.Giot@ensg.inpl-nancy.fr

## **Résumé :**

On présente dans ce papier l'interprétation 2D d'essais de séchage, par méthode inverse, pour détermination de la perméabilité d'une argilite en conditions partiellement saturées. L'essai de séchage consiste à mesurer la variation de masse, dont la cinétique est liée à la perméabilité, d'un échantillon de roche sous une humidité relative variable. Les couplages hydromécaniques et la présence de gaz résultent en un problème direct de diffusion non linéaire, résolu par éléments finis. Le modèle de comportement choisi est le modèle thermoporoélastique non linéaire de Coussy, et différents effets de couplage ont été pris en compte. L'interprétation de l'essai de séchage est alors un problème d'identification de paramètres, qui peut être ramené à un problème inverse, consistant en la minimisation d'une fonctionnelle quantifiant l'écart entre les variations de masse mesurées au cours de l'essai et calculées par éléments finis, lesquelles dépendent des paramètres à identifier, c'est-à-dire des paramètres caractérisant la perméabilité.

### Abstract :

This paper deals with the 2D interpretation of drying tests, through an inverse method, for the identification of the permeability of a partially saturated argillite. A drying test consists in measuring the mass variation, whose kinetic depends on permeability, of a rock sample under a variable relative humidity. Hydro-mechanical couplings, as well as the presence of gas both result in a non linear diffusion direct problem, which is solved by a finite element method. The constitutive model chosen is the non linear thermoporoelastic model due to Coussy. Several coupling effects were considered. The back-analysis of drying tests is then a parameter identification problem, which can be brought back to an inverse problem, consisting in the minimisation of a cost-functional quantifying the discard between mass variations measured during the test and calculated by finite element, the later depending on the parameters to be identified, that is the parameters characterizing the permeability.

## Mots-clefs :

# perméabilité ; éléments finis ; inversion

## 1 Introduction

La détermination de la perméabilité en milieu partiellement saturé repose sur des mesures de variations de masse et de déformations d'un échantillon au cours d'un essai de séchage. La cinétique de ces grandeurs est liée à la perméabilité. Dans les roches telles que les argilites, la présence de gaz et les couplages hydromécaniques résultent dans un problème couplé de diffusion fortement non linéaire. Les méthodes numériques telles que les éléments finis doivent alors être utilisées afin de résoudre ce problème, que l'on qualifiera de problème direct. C'est le code éléments finis d'Edf Code Aster qui est utilisé pour modéliser l'essai de séchage.

Une méthode d'interprétation, basée sur des modélisations 1D linéaires et non linéaires de l'essai de séchage, a été présentée par Giraud *et al.* (2006). Dans ce papier, le comportement hydromécanique non linéaire, ainsi que les effets 2D dus à la géométrie et aux dimensions des échantillons sont pris en compte. La loi de comportement choisie est le modèle thermoporoélastique non linéaire développé par Coussy (2004). Divers effets de couplage du fait de la présence de gaz, les forces capillaires dues aux interfaces, ainsi que les changements de phase liquide-vapeur sont pris en compte.

# 2 Modèle hydro-mécanique couplé pour le milieu poreux partiellement saturé

On considère un milieu poreux, constitué d'une matrice déformable, partiellement saturé par un liquide compressible (indice l) en équilibre avec sa vapeur (indice v), laquelle forme un mélange idéal (indice g) avec un autre gaz (air sec, indice a) :

$$\rho_{a} = \frac{M_{a}p_{a}}{RT} ; \rho_{v} = \frac{M_{v}p_{v}}{RT} ; p_{g} = p_{a} + p_{v}$$
(1)

 $M_a$ ,  $M_v$  et *R* désignent respectivement la masse molaire de l'air sec et de la vapeur et la constante des gaz parfait. La pression de vapeur peut être éliminée des équations en utilisant la relation d'équilibre thermodynamique entre l'eau liquide et la vapeur :

$$h_{r} = \frac{p_{v}}{p_{v}^{0}} = \exp\left[\frac{M_{v}}{\rho_{l}RT}\left(p_{g} - p_{c} - p_{l}^{0}\right)\right] \qquad ; \qquad p_{c} = p_{g} - p_{l} \qquad (2)$$

Dans ces relations, l'exposant 0 fait référence à l'état saturé,  $h_r$  désigne l'humidité relative et  $p_v^0$  la pression de vapeur saturante. Parmi les trois variables de pression ( $p_l$  pression liquide,  $p_g$ , pression de gaz,  $p_c$  pression capillaire), la pression capillaire et la pression de gaz ont été choisies comme variables d'état indépendantes. La loi de comportement poroélastique isotherme isotrope non linéaire en conditions partiellement saturées (Coussy 2004) s'écrit de manière incrémentale :

$$d\sigma_{m} = K_{O}d\varepsilon_{v} + d\sigma_{p} ; d\sigma_{p} = -b(dp_{g} - S_{l}dp_{c}) ; ds_{ij} = 2Gde_{ij} ; d\sigma_{ij} = d\sigma'_{ij} + d\sigma_{p}\delta_{ij}$$
  
$$dm_{l} + dm_{v} = C_{l\varepsilon}d\varepsilon_{v} + C_{lc}dp_{c} + C_{lg}dp_{g} ; dm_{a} = C_{g\varepsilon}d\varepsilon_{v} + C_{gc}dp_{c} + C_{gg}dp_{g}$$
(3)

Dans ces équations,  $\sigma_m$ , s,  $\sigma'$ ,  $\varepsilon_v$ , e,  $m_i$ ,  $K_O$  et G désignent respectivement la contrainte moyenne totale, le tenseur déviateur des contraintes, le tenseur des contraintes effectives, la déformation volumique, le tenseur déviateur des déformations, l'apport de masse fluide des constituants, et les coefficients de compressibilité drainé et de cisaillement. La contrainte  $\sigma_p$ représente la contrainte mécanique due aux fluides saturant les pores, et  $S_l$  la saturation en liquide. Les paramètres de couplage  $C_{ij}$  sont fonctions de la saturation et de sa dérivée par rapport à la pression capillaire, ainsi que des pressions partielles.

En négligeant les effets de la gravité, la loi de Darcy généralisée (Whitaker 1998) pour la diffusion du liquide et du gaz, s'écrit :

$$\frac{w_i}{\rho_i} = -\lambda_i \nabla p_i \qquad ; \qquad \lambda_i = \frac{k K_i^{rel} [S_i]}{\mu_i}$$
(4)

où k est la perméabilité intrinsèque, et  $\lambda_i$ ,  $w_i$ ,  $K_i^{rel}$  et  $\mu_i$  désignent respectivement la conductivité, le flux, la perméabilité relative et la viscosité dynamique du fluide *i*. La diffusion de la vapeur dans le gaz est prise en compte par la loi de Fick, avec *F* coefficient de Fick :

$$\frac{w_v}{\rho_v} = \frac{w_a}{\rho_a} = -F\nabla C_v \ ; \ C_v = \frac{p_v}{p_g}$$
(5)

Les équations de conservation de la masse pour l'eau et l'air sec s'écrivent :

(8)

$$\frac{\partial}{\partial t} [m_l + m_v] = -\nabla [w_l + w_v] \qquad ; \qquad \frac{\partial m_a}{\partial t} = -\nabla [w_a] \qquad (6)$$

Les équations de champs non linéaires sont obtenues en insérant les relations de Darcy et de Fick, ainsi que les équations de comportement dans les équations de conservation de la masse dans lesquelles les coefficients  $C_{ij}$  et  $K_{ij}$  sont fonctions des pressions capillaires et de gaz :

$$C_{l\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon_{v}}{\partial t} + C_{lc} \frac{\partial p_{c}}{\partial t} + C_{lg} \frac{\partial p_{g}}{\partial t} = \nabla \left[ K_{lc} \nabla p_{c} + K_{lg} \nabla p_{g} \right]$$

$$C_{g\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon_{v}}{\partial t} + C_{gc} \frac{\partial p_{c}}{\partial t} + C_{gg} \frac{\partial p_{g}}{\partial t} = \nabla \left[ K_{gc} \nabla p_{c} + K_{gg} \nabla p_{g} \right]$$
(7)

Ces équations sont complétées par l'équation d'équilibre mécanique :  $\nabla . \sigma = 0$ 

La masse d'eau perdue est calculée par l'équation (3). Pour le problème direct de séchage, correspondant à un changement d'humidité relative, ce système d'équations est complété par des conditions aux limites hydrauliques de type Dirichlet et des contraintes normales nulles. Il est résolu numériquement à l'aide du code de calcul éléments finis Code\_Aster d'Edf, dont la méthode de résolution est basée sur l'algorithme de Newton-Raphson.

# 3 L'essai de séchage

La caractérisation de la perméabilité en conditions partiellement saturées repose sur l'essai de séchage, consistant à mesurer les variations de masse d'un échantillon de roche lorsqu'il est soumis, sur toute sa frontière, à une hygrométrie variable. La cinétique de variation de masse est liée à la perméabilité. Le principe de l'essai et le dispositif expérimental sont décrits par Giraud *et al.* (2006). Un échantillon rocheux partiellement saturé cylindrique, de hauteur L=20mm et de rayon R=25 mm, est introduit à l'intérieur d'une chambre hermétique dont l'hygrométrie est imposée et maintenue constante par une solution saline. Les dimensions de l'échantillon permettent d'obtenir une surface d'échange maximale à la base (z=0) et au sommet (z=L) par rapport à la surface latérale (r=R), et de minimiser le temps de diffusion axiale. Ces petites dimensions résultent en des variations de masse très faibles. Un appareillage spécifique a donc été développé pour améliorer la précision des mesures de masse, température et hygrométrie.

La pression capillaire imposée aux limites de l'échantillon correspond à l'humidité relative de la chambre. L'échantillon est supposé initialement en équilibre thermodynamique avec la chambre, à l'humidité relative  $h_r^0$ . L'échantillon est donc partiellement saturé, et les pressions capillaire, de gaz et de vapeur y sont homogènes. Pour une solution saline donnée, à une température constante de T=293K, les pressions initiales sont données par :

$$p_{c}(x,t=0) = p_{c}^{0} = -\frac{\rho_{l}RT}{M_{v}}\ln[h_{r}^{0}]; \ p_{g}(x,t=0) = p_{atm}; \ p_{v}(x,t=0) = p_{v}^{s}(T)h_{r}^{0}$$
(9)

A l'instant t=0<sup>+</sup>, la solution saline est changée, ce qui provoque un changement d'humidité relative dans la chambre, à la valeur  $h_r^{imp}$ . Les mesures montrent que l'humidité relative est stable dans la chambre au bout de  $t_m$ =4 à 5 heures. Dans les simulations numériques, une rampe correspondant à cette durée est donc appliquée à la pression capillaire, qui est par la suite maintenue constante. Ce changement d'hygrométrie entraine une variation de la pression capillaire sur le contour de l'échantillon (noté  $\partial\Omega$ ), supposée uniforme :

$$\left[ p_c(x,t \ge t_m) \right]_{x \in \partial\Omega} = p_c^{imp} = -\frac{\rho_l RI}{M_v} \ln \left[ h_r^{imp} \right]; \left[ p_c(x,t \le t_m) \right]_{x \in \partial\Omega} = p_c^0 + \frac{t}{t_m} \left( p_c^{imp} - p_c^0 \right)$$

$$\left[ p_g(x,t \ge 0^+) \right]_{x \in \partial\Omega} = p_{atm}$$

$$(10)$$

# 4 Le problème inverse

# 4.1 Le problème d'identification

L'approche non linéaire du problème direct de séchage conduit à considérer une capacité capillaire et une conductivité hydraulique fonctions de la pression capillaire. L'interprétation de l'essai revient alors à identifier les paramètres définissant ces fonctions. La capacité capillaire est exprimée comme étant le produit de la porosité et de la dérivée de la saturation. Elle est ainsi définie par les deux paramètres  $a_{vv}$  et  $b_{vv}$  de la fonction de saturation, choisie de type Vachaud-Vauclin (Vachaud *et al.* 1979), sur la base d'essai microgravimétriques :

$$S_{l}(p_{c}) = \frac{a_{vv}}{a_{vv} + \left(\frac{p_{c}}{10^{4}}\right)^{b_{vv}}}$$
(11)

La conductivité hydraulique est le produit des perméabilités intrinsèques et relatives, divisé par la viscosité du liquide, supposée constante en conditions isothermes. La perméabilité intrinsèque a été identifiée à partir de pulse tests en conditions saturées (Homand *et al.* 2005) de sorte que l'inconnue est la perméabilité relative, pour laquelle la fonction considérée est la suivante :

$$K_{l}^{rel} = \frac{1}{1 + (a_{l}(1 - S_{l}))^{b_{l}}}$$
(12)

Quatre paramètres définissent ainsi la capacité et la conductivité hydraulique. Les paramètres  $a_{vv}$  et  $b_{vv}$  affectent la saturation, donc à la fois la capacité et la conductivité. Ces deux paramètrent interviennent donc à la fois sur la perte de masse asymptotique et l'évolution transitoire durant l'essai de séchage. Les paramètres  $a_l$  et  $b_l$  affectent uniquement la perméabilité, et donc l'évolution transitoire. Sur la base d'une étude de sensibilité sur les quatre paramètres, le vecteur des paramètres à identifier choisi est  $c = \{a_{vv}, a_l\}$ .

L'interprétation de l'essai de séchage en non linéaire est ainsi un problème d'identification de paramètres, qui revient à la résolution d'un problème inverse.

## 4.2 Formulation du problème inverse et méthode de résolution

Le problème inverse de l'essai de séchage est un problème de minimisation. Il consiste à trouver  $\alpha_{vv}$  et  $\alpha_l$ , valeurs des paramètres  $a_{vv}$  et  $a_l$  telles que les variations de masse calculées par éléments finis coïncident au mieux avec les variations de masses mesurées expérimentalement :

$$\begin{cases} (\alpha_{vv}, \alpha_{l}) = \arg\min \delta(c) \quad \text{avec} \quad c = (a_{vv}, a_{l}) \\ \delta(c) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Nmes} \omega_{i} (\theta(c, t_{i}) - \theta_{mes}(t_{i}))^{2} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Npar} \upsilon_{j} (c_{j} - c_{j}^{prior})^{2} \quad \text{avec} \quad \theta_{mes}(t_{i}) = M_{mes}(t_{i}) - M_{0} \\ \theta(c, t_{i}) = M(c, t_{i}) - M(c, t_{0}) \quad M(c, t_{i}) = \int_{\Omega} m(c, t_{i}, x) dV \quad m(c, t_{i}, x) = m_{l}(c, t_{i}, x) + m_{v}(c, t_{i}, x) \\ m_{l}(c, t_{i}, x) \text{ et } m_{v}(c, t_{i}, x) \text{ obtenus par résolution du système (7) - (8) et de (3) \end{cases}$$
(13)

 $\theta_{mes}$ ,  $\theta$  et  $N_{mes}$  représentent respectivement les variations de masse mesurées et calculées et le nombre de prise de mesures.  $\omega_i$  et  $v_j$  sont des fonctions poids.  $c^{prior}$  est un vecteur contenant les valeurs *a priori* des paramètres à identifier ; ils représentent l'information *a priori*. La fonctionnelle  $\delta(c)$  est ainsi la somme de deux termes, l'un quantifiant l'écart quadratique entre les variations de masse mesurées et calculées, l'autre prenant en compte l'information *a priori* sur les paramètres. Ce terme d'information *a priori* permet de lisser la fonctionnelle et de réduire la probabilité d'identifier un minimum local, problème fondamental des méthodes

inverses de type gradient. Les coefficients  $\omega_i$  et  $v_j$  permettent de prendre en compte, lorsqu'elles sont disponibles, des informations statistiques, à la fois sur les données expérimentales et l'information *a priori*. Lorsque cette information est disponible, ces coefficients sont les termes d'une matrice de covariance. Ces termes permettent de quantifier la confiance en les mesures (l'erreur expérimentale) et en l'information *a priori*.

Il existe de nombreuses méthodes d'inversion, dont une présentation dans le cadre de la géomécanique peut être trouvée notamment dans Giot (2004). Pour l'inversion de l'essai de séchage, c'est une méthode de type probabiliste qui a été retenue, consistant à minimiser la fonctionnelle  $\delta(c)$ .

Le problème inverse ainsi défini est fortement non linéaire. Les algorithmes d'optimisation utilisant le gradient de la fonctionnelle sont en général très efficace pour la résolution de tels problèmes. Nous avons choisi l'algorithme de Levenberg-Marquard, qui néglige les dérivées secondes et les remplace par un terme diagonal, fonction d'un paramètre  $\lambda$ , dont la valeur varie au cours de itérations, en fonction de l'évolution de la valeur de la fonctionnelle. L'algorithme de Levenberg-Marquardt combine les avantages de différents algorithmes. Il correspond à une variation douce de la méthode de plus grande pente, en début d'inversion, à un algorithme de Gauss-Newton en fin d'inversion, à proximité du minimum de la fonctionnelle. La convergence est donc rapide en début de processus, et précise en fin d'inversion.

A cet algorithme de minimisation, on ajoute des bornes aux valeurs des paramètres, afin d'assurer un sens physique à la solution trouvée. Ces frontières peuvent également faciliter la convergence de l'algorithme. Afin de réduire les problèmes numériques dus à des paramètres à identifier dont les valeurs ont des ordres de grandeur très différents, on prend également en compte des matrices d'adimentionnalisation. Différents critères de convergence ont été pris en compte pour arrêter le processus itératif. Afin de s'assurer de l'unicité de la solution, le processus itératif est relancé pour différentes valeurs initiales des paramètres à inverser.

Enfin, le calcul du gradient de la fonctionnelle nécessite le calcul des dérivées des variations de masse calculées par rapport aux paramètres à inverser. Ce calcul revient à un calcul d'analyse de sensibilité. Trois méthodes peuvent être utilisées : la différentiation directe, l'état adjoint et la différence finie. C'est cette dernière méthode qui a été retenue, de part sa facilité d'implantation et son universalité. Elle ne nécessite pas de nouveaux développements analytiques et numériques lourds dès qu'on modifie le jeu de paramètres à inverser.

# 4.3 Résultats

Trois échantillons d'une argilite du Callovo-Oxfordien, récupérés à une profondeur de 500 m environ ont été soumis à des essais de séchage isothermes. Les résultats de l'identification des paramètres à l'aide de modélisations 1D linéaires et non linéaires de l'essai de séchage (Giraud 2006) ont été utilisés comme information a priori pour l'inversion en 2D. 5 tests ont été réalisés et interprétés. Les résultats pour l'ensemble des tests sont présentés en détail dans Giraud (2007). On présente ici les résultats d'un essai sur un échantillon, noté B, soumis à une diminution d'hygrométrie de 0,98 à 0,93. La figure 1 donne la comparaison entre la courbe de masse mesurée et calculée avec les paramètres identifiés : l'ajustement est satisfaisant, l'algorithme d'inversion est efficace.

Les valeurs de  $a_{vv}$  et  $a_l$  varient respectivement de 6880 et 42 à 6580 et 63. Une comparaison avec l'identification 1D montre que cette dernière surestime la perméabilité.

# 5 Conclusions

Une méthode d'inversion a été développée pour l'interprétation d'essais géomécaniques, de laboratoire et *in situ*. Cette méthode a été adaptée et appliquée à l'interprétation de l'essai de

séchage, afin de caractériser la perméabilité en conditions partiellement saturées d'une argilite très peu perméable, en tenant compte des effets 2D et des non linéarités dus aux couplages hydromécaniques et à la présence de gaz. Les résultats sont satisfaisants et les courbes de masses ont pu être ajustées pour l'ensemble des essais.



FIG. 1 – Comparaison entre courbes de masse mesurée et calculée.

# Remerciements

Les auteurs souhaitent adresser leurs remerciements à l'ANDRA, Service Scientifique, qui a apporté son soutien à ces travaux.

# Références

- Bonnans, J. F., Gilbert, J. C., Lemarechal, C. & Sagastizabal, C. 1997. Optimisation numérique. Ed. Springer.
- Chavant, C., Granet, S. & Le Boulch D. 2002. Modelling of a nuclear waste disposal : Numerical and practical aspects. In. Biot Conference on Poromechanics 2002, Thimus et al. (eds), pp. 145-150, ISBN 90 5809 394 8, Balkema.
- Coussy, O. 2004 Poromechanics. Ed. Wiley.
- Gill, P.E., Murray, W. & Wright, M. H. 1982. Practical optimisation. Ed. Academic Press.
- Giot, R. 2004. Interprétation des mesures de contraintes par relaxation dans les formations argileuses profondes. Thèse : INPL, Nancy, 244p.
- Giraud, A., Giot, R., Homand, F. & Koriche, A. 2006. Permeability identification of a weakly permeable partially saturated porous rock. *Transport In Porous Media*. In press, DOI 10.1007/s11242-006-9073-4.
- Giraud, A., Giot, R. & Homand, F. 2007. Identification of hydromechanical parameters of a partially saturated argillite: 2D modelling. *Transport In Porous Media*. Soumis.
- Homand, F., Giraud, A., Escoffier, S. & Koriche, A. 2005. Permeability determination of a deep argillite in saturated and partially saturated conditions. *Int. J. Heat Mass Transfer* **48**, 1587-1598.
- Michaleris, P., Tortorelli, D. A. & Vidal, C. A. 1994. Poirier, J., Francois, M. & Cases, J. 1987. Study of water adsorption on na-montmorillonite / new data owing to the use of a continuous procedure. In. Fundamentals of adsorption, New York, Liapis, A. (eds), pp.473-482.
- Tarantola, A. 2002. Inverse problem theory. Ed. Elsevier.
- Vachaud, G., Khanji, D. & Vauclin M. 1979. Coupled transport in multiphase systems : a theory of drying. *Water Resources Research* 15(5),1089-1101.
- Whitaker, S. 1998. Coupled transport in multiphase systems: a theory of drying. In. Adv. In Heat Transfers, Vol. 3 Academic press, New York, p. 1102.